Дополнение к теоретическому обоснованию существования трёхэлектронной связи.

Безверхний Владимир Дмитриевич, Безверхний Виталий Владимирович.
E-mail: bezvold@ukr.net Україна.

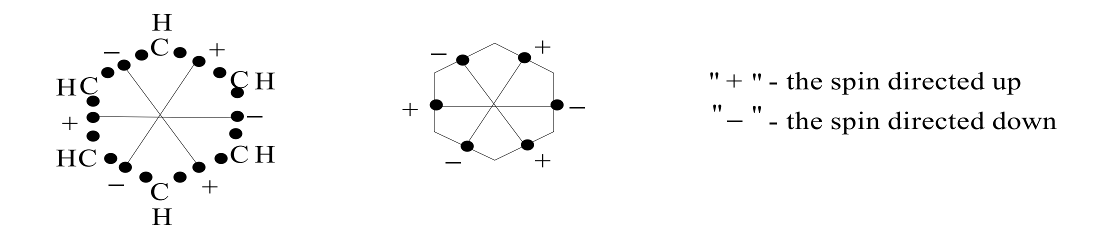
Резюме: Доказана невозможность существования больших ароматических моноциклов на основании взаимодействия трёхэлектронных связей через цикл при расстояниях между связями (через цикл) большими чем 3.5 Å ввиду отсутствия энергетического взаимодействия (длина химических связей находится в диапазоне расстояний 0.74 Å — 3.5 Å). Химическая связь (двухэлектронная и трёхэлектронная) рассматривается на основании допущения, что электроны в химической связи можно считать находящимися в запутанном квантовом состоянии, то есть химическая связь рассматривается как новая «неделимая» частица. Предоставлен алгоритм расчета двухэлектронной химической связи на «кончике пера». Сделана попытка объяснения механизма взаимодействия частиц в запутанном квантовом состоянии на основании новой модели интерферирующей Вселенной.

Ключевые слова: трёхэлектронная связь, химическая связь, фермион, спин, полу-виртуальная частица, запутанное квантовое состояние, интерферирующая Вселенная.

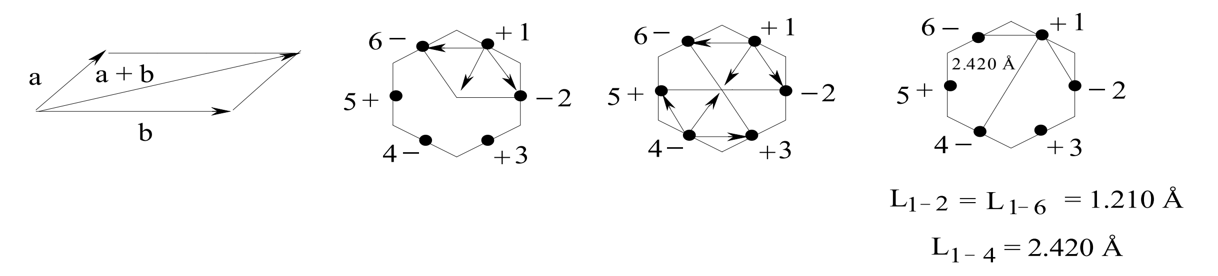
РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.

Взаимодействие двух трёхэлектронных связей в молекуле бензола на расстоянии 2.42 Å (на противоположных сторонах) можно объяснить если рассматривать эти две трёхэлектронные связи как две частицы (два фермиона) в запутанном квантовом состоянии [1, с. 4-11]. То есть, эти два фермиона находятся в запутанном квантовом состоянии. Квантовая запутанность - квантовомеханическое явление, при котором квантовые состояния двух или большего числа фермионов или бозонов оказываются взаимосвязанными [2-6]. И что удивительно, такая взаимосвязь сохраняется практически при любом расстоянии между частицами (когда любые известные взаимодействия не действуют). Необходимо понимать, что запутанная квантовая система представляет собой фактически «неделимый» объект, новою частицу, которая имеет определенные свойства (а частицы с которых она состоит должны соответствовать некоторым критериям). И что особенно важно, что при измерении спина (в общем случае некоторых свойств) первой частицы мы автоматически однозначно будем знать спин (свойства) второй частицы (допустим получим спин положительный, тогда спин второй частицы всегда окажется отрицательным, и наоборот). Две частицы в запутанном состоянии оказываются связанными «невидимой нитью», то есть фактически они образуют новый «неделимый» объект, новую частицу. И это экспериментальный факт.

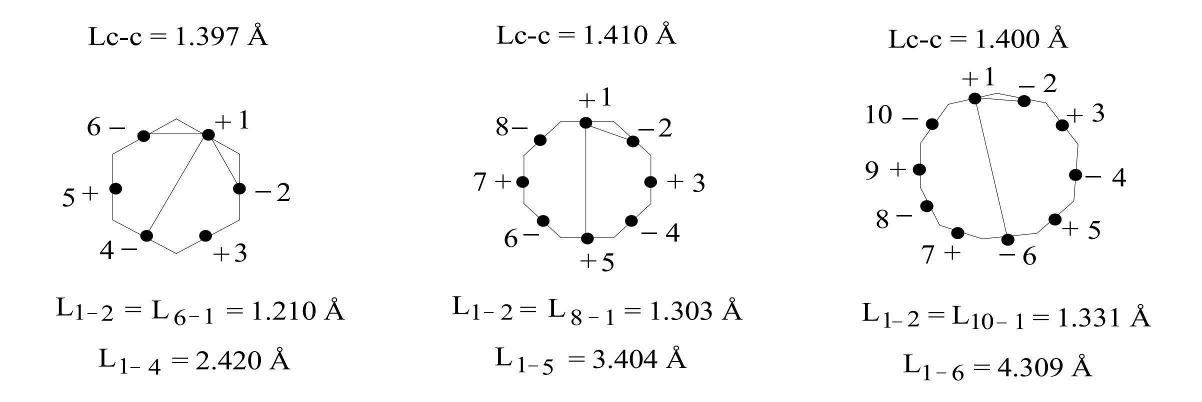
В случае молекулы бензола [1, с. 2-11], если рассматривать взаимодействие всех шести трёхэлектронных связей как запутанное квантовое состояние из шести фермионов (трёхэлектронных связей), то тогда определение спина одного из фермионов автоматически означает знание о всех спинах остальных пяти фермионов, а в более детальном рассмотрении это значит знание о спинах всех 18 электронов бензола, которые образуют все шесть С-С связей. В принципе, исходя из этого, молекулу бензола можно использовать для изучения запутанного квантового состояния электронов (фермионов).



Понять, что взаимодействие трёхэлектронных связей в молекуле бензола на расстоянии 2.42 Å будет значительным можно исходя из того факта, что длина связи в молекуле йода (I-I) составляет порядка 2.66 Å. То есть, разумно предположить, что трёхэлектронные связи (или центральные электроны) на расстояниях между ними в 2.42 Å будут взаимодействовать энергетически значительно.



Кроме этого, в общем случае, длина химических связей находится в приблизительном диапазоне 0.74 Å — 3.5 Å. Величина в 3.5 Å в принципе ограничивает существование больших моноциклических ароматических систем типа циклодекапентаена.



Так как, расстояние между противоположными связями равно 4.31 Å, то есть существенного взаимодействия между трёхэлектронными связями (или электронами, находящимися на противоположных сторонах цикла) а значит и стабилизации цикла не будет, поскольку расстояние больше 3.5 Å, то есть больше длины «самой длинной химической связи» [1,   с. 8]. А без этой энергии взаимодействия невозможно будет стабилизировать большую моноциклическую ароматическую систему в которой напряжение цикла существенно возрастет.

В других системах типа нафталина, антрацена, тетрацена, пентацена и т. п. в которых наиболее длинное взаимодействие между двумя трёхэлектронными связями разных циклов (длина больше 3.5 Å) будет также несущественным с точки зрения образование химической связи [1, с. 19-20, 22, 23, 29].

нафталин

антрацен

фенантрен

Трёхэлектронные связи существовать в таких системах будут (стабилизация систем за счет остова шестичленных циклов), но существенного взаимодействия на больших расстояниях между конкретными связями не будет (в энергетическом смысле). Но это не значит, что эти трёхэлектронные связи между собой не будут никак взаимодействовать. Наоборот, обязательно будут, и это взаимодействие будет приводить к образованию запутанного квантового состояния, которое фактически и будет определять какой спин у которого электрона (или трёхэлектронной связи) должен быть. Более того, в общем случае, и в двухэлектронной химической связи электроны также можно рассматривать как находящиеся в запутанном квантовом состоянии, которое фактически и определяет их спины.

То, что электроны при образовании химической связи находятся в запутанном квантовом состоянии очень важно для химии и квантово-механических расчетов связей. Например, при расчете двухэлектронной химической связи в молекуле водорода, уже не нужно будет рассматривать движение двух электронов в общем случае, то есть независимое и фактически любое друг относительно друга.

А мы точно будем знать, что в запутанном квантовом состоянии эти два электрона можно рассматривать фактически связанными «невидимой нитью» с определенной длиной, то есть два электрона связаны и образуют новую «неделимую» частицу. То есть, движение двух электронов в поле ядер можно будет описать движением точки находящейся на середине «невидимой нити» (или в центре новой частицы, или в центре масс и т. п.), что должно существенно упростить квантово-механические расчеты.

Длина «невидимой нити» определенно будет существенно меньше суммы ковалентных радиусов атомов водорода, и именно эта длина будет определять кулоновское отталкивание между двумя электронами. Длина «невидимой нити» между электронами в различных химических связях не должна сильно отличатся, и возможно она будет постоянной для всех без исключения химических связей (имеются ввиду двухэлектронные связи), возможно это будет еще одна константа.

Трёхэлектронную связь можно также рассматривать как запутанное квантовое состояние в котором находятся три электрона. Тогда длина «невидимой нити» между электронами будет отличной от таковой для двухэлектронной связи. Также можно ожидать, что для всех без исключения трёхэлектронных связей расстояние между электронами будут одинаковыми, то есть константами.

Все типы химических связей (двухэлектронные, трёхэлектронные, четырехэлектронные, пятиэлектронные, шестиэлектронные и т. д.) можно рассматривать как запутанное квантовое состояние в котором находятся электроны участвующие в образовании химической связи. И что интересно, все запутанные частицы ведут себя так, как им положено по квантовой теории, то есть их характеристики остаются неопределенными до момента измерения. С этой точки зрения (с квантово-механической) становится понятной причина неудач расчета химических связей «на кончике пера» с попытками вычислить скорость и энергию электронов и другие характеристики. Но эти характеристики электронов химической связи (химическая связь - квантовая запутанная система в которой находятся электроны связи) не могут быть определены в принципе, потому что так устроен квантовый мир. Логично, что то, что не возможно определить, невозможно в принципе и посчитать, что и подтверждает история квантово-химических расчетов. То есть, все попытки вычислить характеристики электронов химической связи (скорость, энергия и т. п.) были обречены на неудачу изначально. Поэтому, более верным на наш взгляд рассматривать химическую связь как некоторую новою «неделимую» частицу, с вполне определенными характеристиками и пространственной протяженностью, которую мы назвали «полу-виртуальной частицей» [14, с. 4-6.]. В конкретном химическом веществе химическая связь

действительно неделимая. Кроме этого, такая полу-виртуальная частица для трёхэлектронной связи и других связей с непарным количеством электронов и суммарным полу-целым спином является фермионом. А полу-виртуальная частица для двухэлектронных связей и других связей с парным количеством электронов и суммарным целым или нулевым спином будет бозоном. Характеристики же полу-виртуальной частицы (как целого) мы уже сможем рассчитать. Именно эти характеристики полу-виртуальной частицы такие как энергия, пространственная протяженность, длина и т. д. очень важны для химии.

Расчеты молекулы водорода фактически сведутся к решению движения одной точки в поле двух протонов, что аналогично решению задачи для молекулярного иона водорода H_2^+ [7-13]. И можно ожидать, что наконец двухэлектронная химическая связь будет рассчитана «на кончике пера». Кроме этого запутанное квантовое состояние наглядно демонстрирует, что химическая связь реально существует, и что это не абстракция и не удобное понятие используемое для описания и объяснения. Два электрона действительно образуют химическую связь (которая является новой частицей), и они действительно «знают спин друг друга» и находятся в запутанном квантовом состоянии. Это значит, что эти два электрона образующие химическую связь связанные между собой «невидимой нитью» и сами имеют вполне определенные характеристики. Но связь (или нить) эта реальна, но не в энергетическом понимании (энергия такой связи если и существует и не равна нулю то величина ее не сравнима с энергиями химических связей).

Теперь, попытаемся объяснить как вообще возможно взаимодействие электронов или других частиц находящихся в запутанном квантовом состоянии, что предполагает наличие между ними любого расстояния, например 1 м, или 1000 км, это не существенно, расстояние может быть сколь угодно большим. И это расстояние никак не влияет на запутанную квантовую систему, частицы которой чудесным образом знают характеристики друг друга. Для этого нам придется смоделировать нашу Вселенную. Итак, представим себе нашу бесконечную Вселенную как конечный (для удобства описания) объект, например как обыкновенный куб. Теперь представим этот куб пустым от материи, пространства-времени и вообще любых полей и иных характеристик, там нет никакой материи, и в принципе ничего. Теперь «внесем» в куб электрон, и сразу во Вселенной появится пространство-время, масса, разнообразные поля (гравитационное, электромагнитное и т. п.), энергетические и другие характеристики. После того, как во Вселенной появился электрон она ожила, и в принципе родилась. А теперь уточним, что электрон не просто находится во Вселенной и имеет конкретные координаты и точечный размер, а его поля (электромагнитное, гравитационное и другие существующие и неведомые) занимают и наполняют всю Вселенную, весь пространственно-временной континуум, всю нашу бесконечную Вселенную. Теперь поэтапно будем вносить в наш куб (в нашу Вселенную) все элементарные частицы, которые существуют во Вселенной. И есть одно условие которое должно

исполнятся: каждая элементарная частица занимает целиком и полностью всю Вселенную своими полями, энергетическими и иными характеристиками, то есть каждая частица полностью заполняет (в прямом смысле) всю бесконечную Вселенную, но при этом она имеет определенные координаты (наиболее вероятное место обнаружения элементарной частицы).

При таком описании наша Вселенная бесконечная во всех смыслах (пространственном, энергетическом, временном и других) будет представлять собой такую гигантскую интерференцию всех без исключения элементарных частиц, такая себе модель «Интерферирующей Вселенной». А теперь главное: поскольку каждая элементарная частица занимает (заполняет) всю Вселенную (и при этом находится в конкретном месте с определенными координатами (наиболее вероятностное ее определение в данной точке, или более строго в данной области пространства)), то нет ничего необычного в том, что при образовании запутанного квантового состояния каждая элементарная частица «знает» характеристики своего партнера по квантовом состоянии. Элементарные частицы все «знают» обо всех других элементарных частицах, так как заполняют одну Вселенную (это их общий дом). Они (элементарные частицы) постоянно взаимодействуют друг с другом, интерферируют, но в зависимости от своих характеристик и характеристик партнеров (координаты, массы, энергии, поля, расстояний между максимумами плотностей обнаружения, волновыми характеристиками и т. п.) образуют устойчивые связи (самые разнообразные и не только энергетические) только с определенными частицами-партнерами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Исходя из вышесказанного, можно сделать вывод, что наша Вселенная, точнее наш мир, есть интерференционная картина всех без исключения элементарных частиц существующих во Вселенной. Теперь становится интуитивно понятным корпускулярно-волновой дуализм частиц, вероятностная трактовка квантово-механических явлений и другие квантовые эффекты микромира. Например, почему есть ненулевая вероятность обнаружения электрона, который вращается в конкретном атоме водорода (который находится в конкретной лаборатории), например на Луне. А он и есть, и на Луне, и на Солнце, и вообще в любой точке пространства нашей Вселенной, он реально наполняет (занимает) собой всю Вселенную. Только присутствие его в конкретной области, «плотность присутствия» если можно так выразиться (вероятность его обнаружения), в различных точках пространства различна.

В интерферирующей Вселенной все элементарные частицы «знают все» обо всех других элементарных частицах (так как находятся в одной Вселенной), но не все всем подходят для образования различных связей (в энергетическом и других смыслах). Поэтому взаимодействуют только те частицы, которые имеют вполне определенный набор характеристик друг для друга и для конкретных типов взаимодействий. Как следствие таких взаимодействий образуется наш мир.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Bezverkhniy V. D. Structure of the benzene molecule on the basis of the three-electron bond.

2. Scheidl T. & al. (2010), "Violation of local realism with freedom of choice", arXiv:*0811.3129v2* [quant-ph].

3. Herrmann L. G., et al. Carbon Nanotubes as Cooper-Pair Beam Splitters. Physical Review Letters, 2010, 104, 2. DOI:10.1103/PhysRevLett.104.026801.

4. Lettner M., et al. Remote Entanglement between a Single Atom and a Bose-Einstein Condensate. Physical Review Letters. 2011, 106, 21. DOI:10.1103/PhysRevLett.106.210503.

5. Moehring D. L., et al. Entanglement of single-atom quantum bits at a distance. Nature, 2007, 449, DOI:10.1038/nature06118.

6. Salart D., et al. Testing the speed of „spooky action at a distance“. Nature, 2008, 454, DOI:10.1038/nature07121.

7. Scott, T. C., Aubert-Frécon, M., Grotendorst, J. (2006). "New Approach for the Electronic Energies of the Hydrogen Molecular Ion". Chem. Phys. 324 (2–3): 323-338. arXiv:physics/0607081. doi:10.1016/j.chemphys.2005.10.031.

8. Burrau Ø (1927). "Berechnung des Energiewertes des Wasserstoffmolekel-Ions (H+2) im Normalzustand". Danske Vidensk. Selskab. Math.-fys. Meddel. (in German). M 7:14: 1–18. Burrau Ø (1927). "The calculation of the Energy value of Hydrogen molecule ions (H+2) in their normal position” (PDF). Naturwissenschaften (in German) 15 (1): 16–7. doi:10.1007/BF01504875.

9. Karel F. Niessen Zur Quantentheorie des Wasserstoffmolekülions, doctoral dissertation, University of Utrecht, Utrecht: I. Van Druten (1922) as cited in Mehra, Volume 5, Part 2, 2001, p. 932.

10. Pauli W (1922). "Über das Modell des Wasserstoffmolekülions". Annalen der Physik 373 (11): 177–240. doi:10.1002/andp.19223731101. Extended doctoral dissertation; received 4 March 1922, published in issue No. 11 of 3 August 1922.

11. Urey HC (October 1925). "The Structure of the Hydrogen Molecule Ion". Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 11 (10): 618–21. doi:10.1073/pnas.11.10.618. PMC 1086173. PMID 16587051.

12. Pauling, L. (1928). "The Application of the Quantum Mechanics to the Structure of the Hydrogen Molecule and Hydrogen Molecule-Ion and to Related Problems". Chemical Reviews 5 (2): 173–213. doi:10.1021/cr60018a003.

13. Clark R. Landis; Frank Weinhold (2005). Valency and bonding: a natural bond orbital donor-acceptor perspective. Cambridge, UK: Cambridge University Press. pp. 91–92. ISBN 0-521-83128-8.

14. Bezverkhniy V. D. Experimental confirmation of the existence of the three-electron bond and theoretical basis of its existence.